

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2006)

Zeit: mittwochs 14:15, Ort: Seminarraum NC 03/399

- Sondertermin** **Andreia Luisa da Rosa**, Department of Physics, Uppsala University
05. 04. 2006 *Ferromagnetism in transition-metal doped wide band gap semiconductors*
Zeit: 10.15
12. 04. 2006 **Andreas Köhn**, Physikalische Chemie, Universität Mainz
Treatment of doubly-excited states in coupled-cluster theory
19. 04. 2006 **Jean-Marie Mouesca**, Département de recherche fondamentale sur la matière condensée, CEA Grenoble
Electronic and magnetic properties of [2Fe-2S] redox systems: Theory and experiments
- Sondertermin** **Peter Kratzer**, Theoretische Physik, Universität Duisburg-Essen
Di 25. 04. 2006 *Chemical reactions and surface diffusion of hydrogen on the Si(001) surface - a test ground for methodologies*
11.15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
03. 05. 2006 **Peter Hildebrandt**, Fakultät für Chemie, Technische Universität Berlin
Photoinduced processes in sensory photoreceptors - Insight by resonance Raman spectroscopy
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
10. 05. 2006 **Arezo Dianat**, Theoretische Chemie, Universität Ulm
Hydrogen Dissociation Dynamics on Transition Metal Surfaces
- Sondertermin** **Festkolloquium zu Ehren von Professor Staemmler**
Fr 12. 05. 2006
10.00, HNC 30
17. 05. 2006 **Timo Fleig**, Theoretical and Computational Chemistry, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf
Advances in relativistic 4-component electron correlation methods
24. 05. 2006 **Ika Hegemann**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Copper atoms interacting with polar zinc oxide surfaces
- Sondertermin** **Kok Hwa Lim**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Technische Universität München
31. 05. 2006
Zeit: 11.15 *DFT studies relevant to methanol steam reforming*
31. 05. 2006 **Alexander Auer**, Department of Chemistry, Technische Universität Chemnitz
Prediction of molecular properties for large systems
07. 06. 2006 **Giovanni Ciccotti**, Department of Physics, University of Rome "La Sapienza"
Quantum-classical statistical dynamics with trajectories
14. 06. 2006 **Christian Neiß**, Institut für Nanotechnologie, Forschungszentrum Karlsruhe
Response properties using explicitly correlated coupled cluster theory
- Sondertermin** **Marek Sierka**, Theoretische Chemie, Humboldt-Universität Berlin
Di 20. 06. 2006 *Interplay between theory and experiment in the quest of oxides with reduced dimensionality*
11.15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
28. 06. 2006 **Rodolphe Vuilleumier**, Laboratoire de Physique Theorique de Liquides, Universite Pierre et Marie Curie Paris
Vibrational spectroscopy at finite temperature from ab initio Molecular Dynamics simulations
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
05. 07. 2006 **Ralf Drautz**, Department of Materials, University of Oxford
Bond-order potentials: bridging the electronic-atomistic modeling hierarchies in materials science
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
- Sondertermin** **Gerald Brönstrup**, Institut für Festkörperphysik, Universität Jena
Do 06. 07. 2006 *Ion tracks in GaAs*
Zeit: 14.15
- Sondertermin** **Oleg Prezhdo**, Department of Chemistry, University of Washington (Seattle)
Mo 10. 07. 2006 *Photoexcitation dynamics in quantum dots, carbon nanotubes and molecule-semiconductor interfaces*
Zeit: 14.15
- Sondertermin** **Jordi Boronat**, Departament de Fisica i Enginyeria Nuclear, Universitat Politecnica de Catalunya
12. 07. 2006
Zeit: 10:15 *Higher-order actions for path integral Monte Carlo simulations*
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !